シリコン量子細線における弾道的フォノン熱輸送に与える断面ひずみの影響
Cross-sectional Strain Effects on Ballistic Phonon Thermal Transport in Silicon Nanowires

○服部 淳一 （産総研）
○Junichi Hattori (AIST)
E-mail: j.hattori@aist.go.jp

背景　トランジスタの微細化が進み，半導体集積回路における発熱密度が高まるにつれて，熱によるトランジスタや集積回路の性能低下を防ぐ熱設計がますます重要になってきている．これを受けて，トランジスタにおける熱輸送現象への関心も高まってきている．また，トランジスタの微細化の過程では，ひずみによる性能向上技術も開発され，近年は広く利用されている．熱輸送とひずみ，両者の間には不明な点が多い．著者らは次世代トランジスタのチャネル材料とされるシリコン量子細線（Si NW）について，フォノンによる熱輸送とひずみの関係を調べ，Si NW の熱輸送能力が軸ひずみによって変化することを明らかにした [1]．本稿では，軸ひずみに代えて軸に垂直な方向のひずみについて，Si NW におけるフォノン熱輸送への影響を調べる．

方法　まず，Fig. 1 に示すような軸に垂直な方向にひずみが加わった Si NW の原子モデルを，原子の平衡位置を探索する [1] ことによって作成した．その際，表面原子に一定の力を加える（Constant force model），応力に相当する力を加える（Stress-like force model），または，型枠として表面原子の外側に不動の原子を配置する（Mold model）ことで，ひずみを導入した．次に，原子モデルからフォノンの分散関係を計算した．最後に，フォノンは散乱を一切受けず弾道的に伝導するという仮定の下，得られた分散関係から熱コンダクタンス [1] を計算した．

結果　断面に平行なひずみが加わった Si NW における熱コンダクタンスを Fig. 2 に示す．横軸は断面の面積ひずみであり，その値は断面に平行な二つの結晶軸それぞれの方向の垂直ひずみの和に概ね等しい．また，負が圧縮ひずみ，正が引っ張りひずみに対応する．図から，前述のひずみ導入法の違いによらず，Si NW の熱輸送能力は圧縮ひずみで向上し，引っ張りひずみで低下することが分かる．これは，軸方向ひずみを加えた場合と同じである．なお，Si NW における軸方向ひずみは平均して 0 である．このような振る舞いの原因については講演にて報告する．

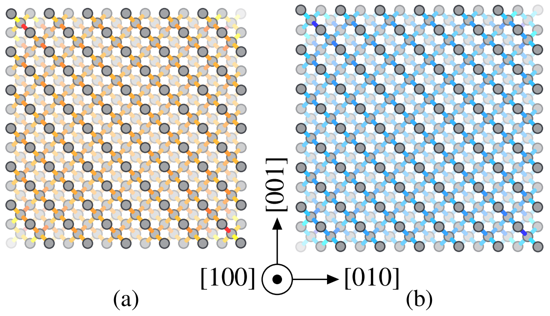

Fig. 1. Top views of cross-sections of [100]-oriented Si NWs under (a) compressive and (b) tensile strain, whose unstrained area is about 3.27 nm by 3.27 nm. A constant force is acting on each surface atom to distort the NWs. Also, the strain of each atomic bond is expressed by hue, from red (compressive) via green (zero) to blue (tensile).

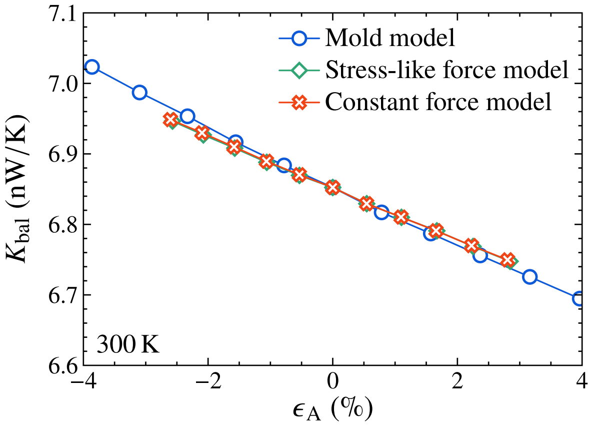

Fig. 2. Ballistic thermal conductance of Si NWs plotted as a function of cross-sectional strain. In the calculation, different models were used to apply strain to the NWs.

謝辞　本研究は，日本学術振興会の科学研究費助成事業の助成を受けたものである（JP16K18082）．

参考文献　[1] J. Hattori *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 04EP07 (2016).